M winmostar チュートリアル

LAMMPS/Gromacs 界面張力

V11.13.0 2025年 7月 1日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.



- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方はビギナーズマニュアルを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
 - Winmostar導入講習会:基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>:理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
 - 個別講習会:ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず<u>よくある質問</u>を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾な く、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。



- ・ 以下の手順で300 Kの水-ベンゼン液-液界面の、密度分布、平衡密度、界面張力を算出します。
 - 1. 成分1の液相の作成
 - 2. 成分1の液相の平衡化計算(エネルギー極小化→温度一定MD→温度圧力一定MD)
 - 3. 成分2の液相の作成
 - 4. 成分2の液相の平衡化計算(エネルギー極小化→温度一定MD→温度圧力(z)一定MD)
 - 5. 液液界面系の作成
 - 6. 液液界面系の平衡化計算 (エネルギー極小化→温度一定MD→温度圧力(z)一定MD)
 - 7. 液液界面系の本計算 (温度圧力(z)一定MD)

注意点:

- 本書の計算はチュートリアルとして短時間で実行できるよう比較的少ない分子数で計算します。
- 分子の種類、初期密度に応じて平衡化に必要なステップ数は変化します。
- "本計算"のステップ数が大きいほど、再現性が良く、信頼性の高い結果を取得することができます。特に界面張力の算出値の収束は遅いです。
- 力場の種類、相互作用の計算条件も計算結果に大きく影響を与えます。

動作環境設定

- 本機能を用いるためにはCygwinのセットアップが必要です。LAMMPSを用いるためには LAMMPSのセットアップが必要です。
- <u>https://winmostar.com/jp/installation/</u>インストール方法のWindows用のLAMMPSと Cygwinの設定手順に従います。

(6) こちらの手順に従いWinmostar用のCygwin環境(CygwinWM)を構築します。

(7) WinmostarをインストールしたWindows PC(ローカルマシン)上で使用するソルバを、以下のリンク先 の手順でインストールします。リモートサーバでのみ計算を行う場合もインストールしてください。

量子化学計算を実行する方 : <u>GAMESS</u> <u>NWChem</u> <u>Gaussian</u>

分子動力学計算を実行する方: <u>LAMMPS</u>

固体物理計算を実行する方 : <u>Quantum ESPRESSO</u> FDMNES

Fragment ER (別売)を実行する方: NAMD

※ポリマービルダを利用するためにはLAMMPSのインストールが必要です。
 ※使用する予定のないソルバをインストールする必要はありません。
 ※Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMXは前の手順でインストールするCygwinに含まれます。
 ※最大原子数を拡張したMOPAC6を使う場合は<u>こちら</u>から入手してください(動作未保障)。

Winmostar V11の動作モード

V11にはプロジェクトモードとファイルモードの2つの動作モードが用意されています。 本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。 ファイルモードの操作方法は<u>V10のチュートリアル</u>を参照してください。

Winmostar (PREMIUM) V11.0.1

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(D) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)



I. 系のモデリング (成分1)

基本的な操作方法は<u>LAMMPS基礎編チュートリアル</u>または<u>Gromacs基礎編チュートリアル</u>を参照してください。

- 1. ファイル | 新規プロジェクトをクリックし、プロジェクト名に「water_benzene_ift」と入 力して保存をクリックします。
- 2. ツールバーの**フラグメント**を「-C6H5」に変更し**Replace**をクリックしベンゼンができたことを確認します。
- 3. **伊 自動で電荷を割り当て**をクリックし**OK**をクリックします。「正常に電荷が割り当てられました」と表示されたら**OK**をクリックします。
- **4. ②** 溶媒を配置/セルを構築をクリックし、Add Displayed Moleculeをクリックし、Enter # of moleculesと表示されたら「100」と入力しOKをクリックします。
- 5. Buildをクリックします。「系の作成に成功しました」と表示されたらOKをクリックします。





II. 計算の実行(成分1の平衡化計算)

- 1. ソルバで「LAMMPS」または「Gromacs」を選択し、 [☑] (ワークフロー設定) をクリックし、 OKをクリックします。「力場が設定されました」と表示されたらOKをクリックします。
- **2. 2nd job**のSimulation timeを「50」に変更します。(圧力の安定に時間が掛かるため)
- 3. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は**1st job、2nd job、3rd job**の **Precision**を「Low」に変更します。
- 4. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。

		M LAMMPS Work	flow Setup				- 0	×
		Preset Fluid/Amorph	nous NPT Equilibra	dified)	# of J	obs: + 3	-	
				Enable scan calculation Config				
		1st job						
		Ensemble	Minimize \vee	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.	
		Simulation time [ps]	10.	# of snapshots	50	Initial velocity	From parent	\sim
		Free boudnary co	ondition	Precision	Medium \sim	De	tails	
		2nd job						
		Ensemble	NVT ~	Tem ature [K]	300.	Pressure [atm]	1.	
		Simulation time [ps]	50		p	Initial velocity	Random	\sim
		Free boudnary co	ondition		edium 🗸	De	tails	
		3rd job						
		Ensemble	NPT ~	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.	
		Simulation time [ps]	50	# of snapshots	50	Initial velocity	From parent	\sim
		Free boudnary co	ondition	Precision	Medium \vee	De	tails	
		Reset In	nport	Export		0	IK L	
<i>M</i> winmostar	Copyright 2	2008-20	25 X-/	Ability C	o., Ltd.			

II. 計算の実行(成分1の平衡化計算)

- work1~work3の作業フォルダの状態がENDまたはEND(-)に変化したら、作業フォルダで work3をクリックしてからアクションのCoordinate (Final)をクリックし、NPT計算の最終 構造を表示します。
- 2.
 四 (周期境界条件の表現形式)をクリックし再配置しないをクリックします。
- 3. 編集 | 周期境界条件に基づき原子を再配置をクリックしOKをクリックします。
- 4. **① ファイルをエクスポート**をクリックし、「benzene_eq.mol2」として保存します。



III. 系のモデリング(成分2)

- **2. Set Lattice Constants**を選択し、**Same as main window**をクリックします。
- 3. Box TypeをTriclinicに変更します。
- **4. Change only one direction**をクリックし、「Select direction」と表示されたら**OK**をクリックします。「Enter density」と表示されたら「0.9」と入力し**OK**をクリックします。
- 5. Buildをクリックします。「系の作成に成功しました」と表示されたらOKをクリックします。

Na	ame	# Mol	Position	mol/L	✓ Comp	osition	
W	ATER	500	Random	49.958	3 H2O		
	Add Displayed Molecul	e A	dd File (m	ol2,wmm,e	tc.)		
	Add SMILES		Add W	ater			
Si	Set Density		0.900000			g/cm^3	~
) Set Margin from Sol	ute [nm]					
	Set Lattice Constan	ts [nm]	2.61008	2.61008	2.439513		1
1/	Ar	ngles [deg]	90.0	90.0	90.0		┢
			Same	as main w	indow	\checkmark	┟
			Change	only one di	rection		L
В	ох Туре		triclinic		~	K	
т	otal Number of Atom	s: 1500					Г
						_	

IV.計算の実行(成分2の平衡化計算)

- I. ☑ (ワークフロー設定) をクリックします。「継続ジョブを実行しますか?」と表示されたらいいえをクリックします。力場を割り当てウィンドウが出現したらOKをクリックします。
 「力場が設定されました」と表示されたらOKをクリックします。
- 2. 3rd jobのEnsembleをNPT(z)に変更します。
- 3. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は**1st job、2nd job、3rd job**の **Precision**を「Low」、**Simulation time**を「10」に変更します。
- 4. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。

LAMMPS Workflow Setup			- 🗆 X
Preset Fluid/Amorphous NPT Equilibra	tion v (mo	dified)	# of Jobs: + 3 -
			Enable scan calculation Config
1st job			
Ensemble Minimize \vee	Temperature [K]	300.	Pressure [atm] 1.
Simulation time [ps] 10.	# of snapshots	50	Initial velocity \qquad From parent \qquad
Free boudnary condition	Precision	Medium \sim	Details
2nd job			
Ensemble NVT V	Temperature [K]	300.	Pressure [atm] 1.
Simulation time [ps] 50	# of snapshots	50	Initial velocity $$R$$ andom $$\vee$$
Free boudnary condition	Precision	Medium \sim	Details
3rd job			
Ensemble NPT(z)		p.	Pressure [atm] 1.
Simulation time [ps] 50	# apanota		Initial velocity From parent \checkmark
Free boudnary condition	Precision	Medium ~	Details
Reset Import 🔻	Export		OK Cancel

IV.計算の実行(成分2の平衡化計算)

- work4~work6の作業フォルダの状態がENDまたはEND(-)に変化したら、作業フォルダで work6をクリックしてからアクションのCoordinate (Final)をクリックし、NPT計算の最終 構造を表示します。
- 2. 編集 | 周期境界条件に基づき原子を再配置をクリックしOKをクリックします。
- 3. **1** ファイルをエクスポートをクリックし、「water_eq.mol2」として保存します。



V. 系のモデリング(液液界面)

1. MD | 界面ビルダをクリックします。

す。

- 2. Cell 1で...ボタンをクリックし、P.8で保存したbenzene_eq.mol2を選択します。
- 3. Cell 2で…ボタンをクリックし、P.11で保存したwater_eq.mol2を選択します。
- 4. Buildをクリックします。「正常に系が作成されました」と表示されたらOKをクリックしま

NEE		Cell	1			
12		C	Use displayed c	ell		
		0	Load from file	_gmx.wmpjdata	fbenzene_eq.mol	2 🤇
~		a:	26.1008	[A] Alpha:	90.0000	[deg]
		b:	26.1008	[A] Beta:	90.0000	[deg]
		c	26.1008	[A] Gamma	90.0000	[deg]
		se	lected axis [A]:		-1.8008 28	3.2400
		Cel	2) Use displayed c	ell		
		Cell	2) Use displayed o) Load from file	ell _ift_gmx.wmpjda	ta¥water_eq.mol	2
z		Cell C a:	2) Use displayed o) Load from file 26.1008	ell jft_gmx.wmpjda [A] Alpha:	ta¥water_eq.mol: 90.0000	2 [deg]
z	→×	Cell C a: b:	2 Use displayed of Load from file 26.1008 26.1008	ell _ift_gmx.wmpjda [A] Alpha: [A] Beta:	ta¥water_eq.mol: 90.0000 90.0000	2 [deg]
, L	→ ^v	Cell C a: b: c:	2 Use displayed of Load from file 26.1008 26.1008 22.0184	ell ift_gmx.wmpjda [A] Alpha: [A] Beta: [A] Gamma	ta¥water_eq.mol 90.0000 90.0000 : 90.0000	2 [deg] [deg]

VI. 計算の実行(液液界面の平衡化計算)

- 1. M (**ワークフロー設定**)をクリックします。
- 2. 「継続ジョブを実行しますか?…」と表示されたらいいえをクリックします。
- 3. 力場を割り当てウィンドウでOKをクリックします。「力場が設定されました」と表示された らOKをクリックします。
- 4. LAMMPSまたはGromacs Workflow SetupウィンドウでOKをクリックします。
- 5. ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。

		M LAMMPS Workfl	ow Setup				– 🗆 🗙
		Preset Fluid/Amorpho	us NPT Equilibrati	on v (mo	dified)	# of Jo	obs: + 3 -
						Enable scan o	Config
	[1st job					
		Ensemble	Minimize 🗸 🗸	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.
		Simulation time [ps]	10.	# of snapshots	50	Initial velocity	From parent \sim
		Free boudnary cor	ndition	Precision	Medium \sim	De	tails
		2nd job					
		Ensemble	NVT ~	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.
		Simulation time [ps]	50	# of snapshots	50	Initial velocity	Random 🗸
		Free boudnary cor	ndition	Precision	Medium \sim	De	tails
		3rd job					
		Ensemble	NPT(z) ~	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.
		Simulation time [ps]	50	# of snapshots	50	Initial velocity	From parent \sim
		Free boudnary cor	ndition	Precision	Medium \sim	De	tails
••••		Reset Imp	oort 🔻 E	xport		0	K Z
UUL winmostar	Copyri	ght 2008	-2025	X-Abili	ty Co., I	Ltd.	

VII.計算の実行(液液界面の本計算)

- 1. work9の作業フォルダの**状態**がENDまたはEND(-)に変化したら、 **「」**(ワークフロー設定) をクリックします。
- 2. 「継続ジョブを実行しますか?…」と表示されたらはいをクリックします。
- 3. work9_LMP_NPTまたはwork9_GMX_NPTを選択しOKをクリックします。
- 4. Presetを「Fluid/Amorphous NPT Production」に変更します。

쪴 ジョブの継結元の作業フォルダを選択

- 界面張力の算出には比較的長時間の計算が必要なため適宜Simulation timeを変更します。
- 5. EnsembleをNPT(z)に変更します。
- 6. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合Precisionを「Low」に変更します。
- 7. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。

¥	プロジェクト			ジョブの維続元の作業フォル	ダを選択してく	ださい		📃 📖 LAMMPS Workflow Setup – 🗆 🗙
作	業フォルダ (water_benzene_ift_	Im Options	•	名前 work1_LMP_MIN	状態 END(-)	プロファイル pbs_example	出力ファイル場所 Loc(Part)&Rem	Preset Fluid/Amorphous NPT Production
	名前	状態	^	L work2_LMP_NVT	END(-)	pbs_example	Loc(Part)&Rem	Coninue from work9_LMP_NPT Enable scan calculation Config
	work4_LMP_MIN	END(-)		work4_LMP_MIN	END(-)	pbs_example	Loc(Part)&Rem	1st job
	work5_LMP_NVT	END(-)		work5_LMP_NVT	END(-)	pbs_example	Loc(Part)&Rem	Pressure [arm] 1.
	work6_LMP_NPT	END(-)		work7_LMP_MIN	END(-)	nhs example	Loc(Part)&Rem	Free bourdeary condition
	work8 LMP NVT	END(-)		L work8_LMP_NVT	END	ple	Loc(Part)&Rem	
	work9_LMP_NPT	END(-)	~					Reset Import V Export OK Cancel
<		>						
						(ок 🛓 🗧	

VI.結果解析

- work10の作業フォルダの状態がENDまたはEND(-)に変化したら、work10_LMP_NPTまた はwork10_GMX_NPTをクリックしてからアクションのEnergy plotをクリックしCalc Ave をクリックします。Gromacsの場合は「Enter first frame to read」と表示されたらOKをク リックします。
- LAMMPSの場合は界面数(2)と表面張力の積をv_GamNsurf(単位はmN/m)、Gromacsの 場合は界面数(2)と表面張力の積を#Surf*SurfTen(単位はbar*nm)から読み取ります。読 み取り後Closeをクリックします。単位を変換したい場合はツール|単位を変換を使用しま



LAMMPSの場合

Pxz (atm)	U.USU 12 000	529310739 500666401	12.109040844210002 12.120940616091922 8.614667852420485					
∨_GamNsurf (mN/m)	72.464	987242095						
F vdwl (kcal/mol)	E_pair (keal/mol) 5588.000211602100700 F_vdwl (keal/mol) 771.691462990804220							
Gromacsの場合								
Pres-ZA Pres-ZY	23.3019 11.943	8.7 15	011.890 604.455	17.2270 18.6396	(bar) (bar)			
#Surf*SurfTen	481.951	130	4771.95	40.3837 168.712	(bar) (bar nm)			
Box-Vel-YY	0	Ŏ	0	0	(nm/ps)			

VI.結果解析

- 1. リモートジョブの場合は先にwork10の**Receive all remote output files**をクリックし出力 ファイルを取得します。
- work10のアクションのDensity Profileをクリックします。GroupでLAMMPSの場合は MOL01_C6H6とMOL02_H2O、Gromacsの場合はMOL01とWaterにチェックが入った状態 にしDrawをクリックすると、z軸方向の密度分布が表示されます。
- 各相の平衡密度を取得する際は、グラフ右下のOptions | Open Excelをクリックし、csv ファイルを生成し、各種のグラフソフトで適宜適切な関数へフィッティングを行います。
 Options | Calculate Averageを使いるとグラフの区間平均を求めることも可能です。







• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、基礎編チュートリアルについては<u>Winmostar基礎講習会</u> へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては<u>個別講習会</u>のご依頼をご検討ください。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず<u>よくある質問</u>を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、<u>お問合せフォーム</u>に、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上